グリーン関数に対する母関数法
（スピン演算子の場合）

川　崎　辰　夫（京大理）

（１２月３日受理）

§１　Introduction

これは最近Matsubaraによつて導入された母関数法[1]による二時間グリーン関数の定式化を、スピン演算子の場合に適用した報告である。グリーン関数を構成する演算子が生成・消滅演算子の場合、既に高次グリーン関数を低次のグリーン関数にdecouple　することは、問題を残してきた[2]が、スピン演算子の場合は更に一層decoupling　に複雑な問題を蔵していると思われる。それにもかかわらず今日まで高次グリーン関数を物理的数学的に妥当と思われる方法で処理することにより、磁気緩和現象の理論[3]が成功裡に展開されてきた。本試論ではこの時採用された近似を母関数法によつてcheck してみる。その結果少くともdecouplingについては体系的な処法によつてその正当性の裏づけが得られたと思われる。

次に問題はグリーン関数の階層を適当な段階で切断することである。特に吸収線がガウス型の極限を持つ場合には有限の階層で切断することは正しくない。二種類以上の相互作用が共存する場合とか、単一な相互作用でも双極子相互作用の場合には、高温の極限でも吸収線は正確なガウス型にはならない[4]から特に簡単なモデルについてこの問題を考えてみる。

母関数を導入する準備として先ず一般型のグリーン関数に対する漸化式を導く。このときのハミルトニアンとしては交換エネルギーとゼーマンエネルギーの２項のみを採用する。次に母関数を定義しそれの従う方程式を求める。（§２）　Decouplingを体系的に行う処法としていわゆるcumulant 型グリーン関数についての方程式に変換する（§３）。次に磁気緩和理論の展開に用いられたTomita の処法[3]との比較を試みる。最後にガウス型吸収線を高温の極限でもつようなモデルを考える。非現実的ではあるが、ゼーマンエネルギーと一軸性異方性エネルギーのみからなるスピン系をとりスピンの横

川崎辰夫

成分の緩和をしらべる。

§ 2 Formulation

問題を簡単にするためにゼーマン項と交換相互作用項のみからなるハミルトニアンをとる

$$H = -\omega_0 \Sigma_j \overset{0}{S}_j + \Sigma_{ij} J(i-j)\, \tilde{S}_i \cdot \tilde{S}_j \tag{1}$$

ここで $\omega_0 = g\beta H_0$ である。するとオペレーター $\overset{+}{S}, \bar{S}, \overset{0}{S}$ についての運動方程式は

$$\left.\begin{aligned} i\frac{d}{dt}\overset{+}{S}_k &= \omega_0 \overset{+}{S}_k + 2\frac{1}{N}\Sigma_q J(q, k-q)\overset{+}{S}_q \overset{0}{S}_{k-q} \\ i\frac{d}{dt}\overset{0}{S}_k &= \frac{1}{N}\Sigma_q (q, k-q)\overset{+}{S}_{k-q} \overset{0}{S}_q \\ i\frac{d}{dt}\bar{S}_k &= -\omega_0 \bar{S}_k - 2\frac{1}{N}\Sigma_q J(q, k-q)\bar{S}_q \overset{0}{S}_{k-q} \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

ここで $J(\alpha, \beta) \equiv J(\alpha) - J(\beta)$.

一般にスピンオペレーターの任意の積を含むグリーン関数の運動方程式をとく為には、次のようなグリーン関数がわかればよい。

$$G_{lmn} \equiv \theta(t-t_0) < [\overset{+}{S}(r_1''t) \cdots \overset{+}{S}(r_l''t)\overset{0}{S}(r_1't) \cdots \overset{0}{S}(r_m't)\bar{S}(r_1t) \cdots \bar{S}(r_{n-1}t), \bar{S}(r_nt)] >$$

$$= \frac{1}{N^{l+m+n}} \sum_{\{q\}} \exp\{i(\sum_l q_i'' r_i'' + \sum_m q_i' r_i' + \sum_n q_i r_i)\}$$

$$\times \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\{-i\omega(t-t_0)\}\, G_{lmn}(\{q\}, \omega) \tag{3}$$

$$G_{lmn}(\{q\}, \omega) \equiv \left[\overset{+}{q_1''} \cdots \overset{+}{q_l''} \middle| \overset{0}{q_1'} \cdots \overset{0}{q_m'} \middle| \bar{q}_1 \cdots \bar{q}_{n-1} ; \bar{q}_n \right]_{lmn} \tag{4}$$

ここで注意しておくことは、グリーン関数内のオペレーターの順序は常に $\overset{+}{S}\,\overset{0}{S}\,\bar{S}$ の order になるようにし、これを今仮りに normal order と名付けておく。normal ordering には交換関係を用いる。

ハミルトニアン(1)の下での G_{lmn} の運動方程式は(2)を使つて次のように書かれる。

$$\omega G_{lmn}(\{q\}\omega)=iI_{lmn}+\omega_0(\ell-n+1)G_{lmn}(\{q\}\omega)$$

$$+2\sum_{q,k''}J(q,k''-q)\left[\overset{+}{1\cdots k''-1,q,k''+1,\cdots\ell}\,\middle|\,\overset{0}{k''-q,1'\cdots m'}\,\middle|\,\overset{-}{1\cdots n}\right]_{l,m+1,n}$$

$$-2\sum_{q,k}J(q,k-q)\left[\overset{+}{1\cdots\ell}\,\middle|\,\overset{0}{1'\cdots m',k-q}\,\middle|\,\overset{-}{1\cdots k-1,q,k+1,\cdots n}\right]_{l,m+1,n}$$

$$+\sum_{qr'}J(q,r'-q)\left[\overset{+}{1\cdots\ell,r'-q}\,\middle|\,\overset{0}{1'\cdots r-1,r+1,\cdots m'}\,\middle|\,q,1\cdots n\right]_{l+1,m-1,n+1}$$

$$+\sum_{qr'}J(q,r'-q)\left[\overset{+}{1\cdots\ell,r'-q}\,\middle|\,\overset{0}{1'\cdots\overset{\uparrow}{r}\cdots\overset{\uparrow}{s}\cdots m'}\,\middle|\,s+q,1\cdots n\right]_{l+1,m-2,n+1}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$+\sum_{qr}J(q,r'-q)\left[1\cdots\ell,r'-q\,\middle|\,\cdots\cdots\,\middle|\,q+\sum_{m'}r',1\cdots n\right]_{l+1,0,n+1} \qquad (5)$$

計算の便宜上$\overset{+}{S}$, $\bar{S}$ の時間微分は夫々$\overset{+}{S}|\overset{0}{S}$, $\overset{0}{S}|\bar{S}$ の境界で行う。$\overset{0}{S}$は$\overset{+}{S}|\overset{0}{S}$の境界で行うことにする。上式で第五項以下は$\overset{0}{S}$の時間微分により生じた$\bar{S}$を normal order になおすために出て来た項である。交換相互作用の場合には

$$\sum_{q}J(q,k-q)=0 \qquad (6)$$

という性質の為に$\{\overset{+}{S}\overset{0}{S}\}$（対称化）は常に$\overset{+}{S}\overset{0}{S}$となる。

I_{lmn}（非斉次項）は

$$I_{lmn}\equiv\left\langle\left[\overset{+}{p_1\cdots p_l}\,\middle|\,\overset{0}{q_1\cdots q_m}\,\middle|\,\overset{-}{r_1\cdots r_{n-1},r_n}\right]\right\rangle$$

$$=2\sum_{j}A_{l-1,m+1,n-1}\left[\overset{+}{p_1\cdots\overset{\uparrow}{p_j}\cdots}\,\middle|\,\overset{0}{r_n+p_j\,q_1\cdots}\,\middle|\,\overset{-}{\cdots r_{n-1}}\right]$$

$$+2\sum_{j<k} A_{l-1,m,n-1}\left[\overset{+}{p_1\cdots p_j\cdots p_j+p_k+r_n\cdots}\middle|\overset{0}{q_1\cdots}\middle|\overset{-}{\cdots r_{n-1}}\right]$$

$$-\sum_{j} A_{l,m-1,n}\left[\overset{+}{p_1\cdots\cdots\cdots}\middle|\overset{0}{\cdots \overset{\uparrow}{q_j}\cdots}\middle|\overset{-}{r_n+q_j,\,r_1\cdots r_{n-1}}\right] \tag{7}$$

$$-\sum A_{l,m-2,n}\left[\overset{+}{p_1\cdots}\middle|\overset{0}{\cdots \overset{\uparrow}{q_j}\cdots \overset{\uparrow}{q_k}\cdots}\middle|\overset{-}{r_n+q_j+q_k,\,r_1\cdots r_{n-1}}\right]$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$-\sum A_{l,0\,n}\left[\overset{+}{p_1\cdots}\middle|\overset{0}{0\cdots}\middle|\overset{-}{r_n+\Sigma q_j,\,r_1\cdots r_{n-1}}\right]$$

となる。ここで↑印は消える項を表わし A_{lmn} は正準平均をとつたスピン相関関数で

$$A_{lmn}\left[\overset{+}{p}\middle|\overset{0}{q}\middle|\overset{-}{r}\right] \equiv \left\langle \overset{+}{p_1\cdots p_l}\middle|\overset{0}{q_1\cdots q_m}\middle|\overset{-}{r_1\cdots r_n}\right\rangle 。 \tag{8}$$

次にグリーン関数及び非斉次項の母関数を定義する

$$G[\xi\eta\zeta\rho] = \Sigma \frac{1}{\ell!m!(n-1)!}\xi_{p_1}\cdots\xi_{p_l}\eta_{q_1}\cdots\eta_{q_m}\zeta_{r_1}\cdots\zeta_{r_{n-1}}\rho_{r_n} G_{lmn}(\{q\}\omega)^{*)} \tag{9}$$

及

$$I[\xi\eta\zeta\rho] = \Sigma \frac{1}{\ell!m!(n-1)!}\xi_{p_1}\cdots\xi_{p_l}\eta_{q_1}\cdots\eta_{q_m}\zeta_{r_1}\cdots\zeta_{r_{n-1}}\rho_{r_n} I_{lmn} \tag{10}$$

Σ は p, q, r のあらゆる組合せについての和をとることを示す。ξ,η,ζ,ρ は c－数である。

$G[\xi\eta\zeta\rho]$ についての方程式は(5)の両辺に $[\ell!m!(n-1)!]^{-1}\times\{\xi\eta\zeta\rho\}$ を掛けあらゆる可能な $\xi\ \eta\ \zeta$ の組について加えあわせることによつて求められる。その際すべてを母関数 $G[\xi\eta\zeta\rho]$ で書く為に次の様な工夫が必要となる。

演算子 $\Sigma\omega_0\xi_p\frac{\delta}{\delta\xi_p}$ を G に作用させると

$$\sum_p \omega_0\xi_p\frac{\delta}{\delta\xi_p}G = \Sigma\Sigma\frac{\omega_0}{\ell!m!(n-1)!}\{\xi\eta\zeta\rho\}G_{\ell mn}$$

---

*) 可能な限り ξ 等の積を $\{\xi\eta\zeta\rho\}$ と略記する。

これは(5)の第二項に対応する。第三項を得る為には

$$\sum_{r=p+q} J(p,q)\,\xi_r \frac{\delta}{\delta\xi_p}\frac{\delta}{\delta\eta_q}$$

を作用させればよい。即ち

$$\sum_{r=p+q} J(p,q)\xi_r \frac{\delta}{\delta\xi_p}\frac{\delta}{\delta\eta_q} G = \sum_{r=p+q} \Sigma J(p,q) \frac{1}{\ell!(m-1)!(n-1)!}\{\xi\eta\zeta\rho\} G_{\ell mn}$$

$$= \sum_{r=p+q} \Sigma J(p,q) \frac{1}{\ell!m!n!}\{\xi\eta\zeta\rho\} G_{\ell,m+1,n^{\alpha}}\ 。$$

同様な考察によつてすべてのグリーン関数を含む項はその母関数とそれに作用する演算子との積に書きなおされ、(5)は結局

$$\mathscr{H}[\xi\eta\zeta]\, G[\xi\eta\zeta\rho] = I[\xi\eta\zeta\rho] \qquad (11)$$

とまとめられる。ここで

$$\mathscr{H}[\xi\eta\zeta] = \omega - \omega_0 \Sigma\{\xi_p\frac{\delta}{\delta\xi_p} - \zeta_p\frac{\delta}{\delta\zeta_p}\}$$

$$-2\sum_{r=p+q} J(p,q)\{\xi_r\frac{\delta}{\delta\xi_p}\frac{\delta}{\delta\eta_q} - \frac{\delta}{\delta\eta_q}\zeta_r\frac{\delta}{\delta\zeta_p}\}$$

$$-\sum_{q+u=\Sigma r_i}\ \sum_{r=p+q}\ \sum_m \frac{1}{m!} J(p,q)\frac{\delta}{\delta\xi_q}\,\eta_{r_1}\cdots\eta_{r_m}\frac{\delta}{\delta\zeta_u}\ 。 \qquad (12)$$

$I[\xi\eta\zeta\rho]$ はむしろ $A_{\ell mn}$ の母関数

$$A[\xi\eta\zeta] = 1 + \Sigma\Sigma\frac{1}{\ell!m!n!}\{\xi\eta\zeta\}A_{\ell mn} \qquad (13)$$

を用いて書きなおす方が都合がよい。何故なら

$$A_{\ell mn} = \frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathscr{I}m[G_{\ell mn}(\{q\}\omega)}{1-e^{-\beta\omega}} \qquad (14)$$

によつてグリーン関数 $G_{\ell mn}$ に直接結びつけられている量だからである。(12)を求めたのと同様な演算によつて

$$I[\xi\,\eta\,\zeta\,\rho] = I_0[\xi\,\eta\,\zeta\,\rho]\,A[\xi\,\eta\,\zeta] \tag{15}$$

$$I_0[\xi\,\eta\,\zeta\,\rho] = i\{2\cdot\sum_{r=p+q}\xi_p\frac{\delta}{\delta\eta_r}\rho_q + \sum_{s=p+q+r}\xi_p\xi_q\frac{\delta}{\delta\xi_s}\rho_r - \sum_{y=xp_\ell}\sum_\ell\frac{1}{\ell!}\eta_{p_1}\cdots\eta_{p_\ell}\frac{\delta}{\delta\zeta_y}\rho_x\} \tag{16}$$

となる。(11)の両辺を $\xi\,\eta\,\zeta\,\rho$ について展開し両辺から同じ次数のものをひろえば、それに対応した階数のグリーン関数の方程式が自動的に得られ、その階層体系は、普通に我々が高次のグリーン関数の運動方程式を順次作つていつたものに一致することは当然である。

§ 3　Cumulant 型グリーン関数

グリーン関数の方程式が階層をなす場合には、普通適当に切断して閉じた方程式系にせねばならない。その際高次グリーン関数を適当に decouple して低次グリーン関数に書き直しておく方が、そのまま切断するよりも一般によい結果が得られることが知られている。[3),6)]

Tomita[3)] の terminology に従えば前節までの型のグリーン関数をモーメント型といい、可能な cumulant average を引き去つた残りのグリーン関数を Cumulant 型という。この型に対応した処方を母函数法の立場から検討する。

(13)は exponential 型に書き直せて

$$A[\xi\,\eta\,\zeta] = \exp\{\sum\frac{1}{\ell!m!n!}\{\xi\,\eta\,\zeta\}a_{\ell mn} = e^{A_c[\xi\,\eta\,\zeta]} \tag{17}$$

となる。ただし $a_{\ell mn}$ は cumulant average[5)] である。

$$a_{\ell mn} = \langle \overset{+}{p_1}\cdots p_\ell \mid \overset{0}{q_1}\cdots q_m \mid \overset{-}{r_1}\cdots r_n \rangle_c$$

これを用いて Cumulant 型グリーン関数を

$$G[\xi\,\eta\,\zeta\,\rho] = \exp\{A_c(\xi\,\eta\,\zeta)\}\mathcal{G}(\xi\,\eta\,\zeta\,\rho) \tag{18}$$

と定義する。即ち

$$\mathcal{G}(\xi\,\eta\,\zeta\,\rho)=\Sigma\frac{1}{\ell!\,m!\,(n-1)!}\{\xi\,\eta\,\zeta\,\rho\}\mathcal{G}_{\ell mn}$$
$$=\Sigma\frac{1}{\ell!\,m!\,(n-1)!}\{\xi\,\eta\,\zeta\,\rho\}(\overset{+}{p_1}\cdots|\overset{0}{q_1}\cdots|\overset{-}{r_1}\cdots;\overset{-}{r_n})_{lmn} \tag{19}$$

すると方程式 (11) は

$$\mathcal{H}^{C}(\xi\,\eta\,\zeta)\,\mathcal{G}(\xi\,\eta\,\zeta\,\rho)=\mathcal{I}(\xi\,\eta\,\zeta\,\rho) \tag{20}$$

と変換される。ここに

$$\mathcal{H}^{C}=\exp\{-A_C\}\mathcal{H}\exp\{A_C\} \tag{21a}$$

$$\mathcal{I}=\exp\{-A_C\}I_0\exp\{A_C'\} \tag{21b}$$

$A_C(\xi\,\eta\,\zeta)$ は $\{\xi\,\eta\,\zeta\,\rho\}$ と常に交換可能であり順序によらないから

$$\exp\{-A_C\}\cdots\cdots\exp\{A_C\}$$

という変換は微分演算子の部分のみを変化させ

$$\exp\{-A_C\}(\partial/\partial\xi)\exp\{A_C\}=(\partial/\partial\xi)+(\partial A_C/\partial\xi)$$
$$\exp\{-A_C\}(\partial/\partial\eta)\exp\{A_C\}=(\partial/\partial\eta)+(\partial A_C/\partial\eta) \tag{22}$$
$$\exp\{-A_C\}(\partial/\partial\zeta)\exp\{A_C\}=(\partial/\partial\zeta)+(\partial A_C/\partial\zeta)$$

とする。従つて $\mathcal{H}$, I_0 より $\mathcal{H}^C$, $\mathcal{I}$ を得るためには (12) , (16) における微分演算子にすべて上式を代置すればよい。$\mathcal{I}$ は右辺にこれ以上作用するものを持たないから置換したあとの $\partial/\partial\xi$ 等はすべて 0 としてよい。

最後に母関数における (14) に対応した式を求めると

$$A_C(\xi\,\eta\,\zeta)=\frac{1}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathcal{I}m\mathcal{G}(\xi\,\eta\,\zeta\,\zeta)}{1-e^{-\beta\omega}}\,d\omega \tag{23}$$

従つてCumulant 型グリーン関数についていえば、Cumulant の定義式(17)(19)及両者を結ぶ関係式 (23)は閉じた系を構成する。

§ 4 Discussion I

1) Cumulant 型グリーン関数についての方程式はいわゆるdecouplingをほどこした後の方程式に対応する筈である。今の場合はいかにdecouplingを行うかという問題は完全に避けられている。両辺から$\xi\ \eta\ \zeta\ \rho$に関して同次の項をひろえば各階のcumulant 型グリーン関数についての方程式が自働的体系的に得られる。こうして得られた方程式とTomita 型[3] cumulant グリーン関数の方程式とを比較する。

2) $\xi_K \rho_{-K}$ の項をひろうと$\mathcal{G}_{101}$ の方程式が出来て

$$(\omega-\omega_0)(\overset{+}{k};\overset{-}{-k}) = 2\langle\overset{0}{0}\rangle + 2\Sigma J(p,k-p)(\overset{+}{p}\ \overset{0}{k-p};\overset{-}{-k}) + 2J(k,0)\langle\overset{0}{0}\rangle(\overset{+}{k};\overset{-}{-k})$$

同様にして$\xi_p \eta_{k-p} \rho_{-k}$ の項をひろうと$\mathcal{G}_{111}$ の方程式が得られる。これらはTomita and Tanaka[3] の p533 の Table Ⅱ の結果と完全に一致している。

更に $\xi_\alpha\ \eta_\beta\ \eta_\gamma\ \rho_\delta(\alpha=q,\ \beta=p-q,\ r=k-p,\ \delta=-k)$ を調べると少し長くなるが

$$\{\omega-\omega_0-2J(\alpha,0)\langle\overset{0}{0}\rangle\}(\overset{+}{\alpha}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{0}{\gamma};\overset{-}{\delta})_{121}$$

$$\begin{aligned}
=\{\ &2\langle\overset{0}{\alpha+\delta}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{0}{\gamma}\rangle_C-\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{-}{\gamma+\delta}\rangle_C-[\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{0}{\gamma}\ \overset{-}{\beta+\delta}\rangle_C+\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{-}{\beta+\gamma+\delta}\rangle_C]\ \}\\
&+\Sigma J(p,\beta-p)[(\overset{+}{\alpha}\ \overset{-}{\beta-\rho}\ \overset{0}{\gamma}\ \overset{-}{p};+(\overset{+}{\alpha}\ \overset{+}{\beta-p}\ \overset{-}{\gamma+p};]+\Sigma J(p,\gamma-p)[(\overset{+}{\alpha}\ \overset{+}{\gamma-p}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{-}{p};+(\overset{+}{\alpha}\ \overset{+}{\gamma-p}\ \overset{-}{\beta+p};]\\
&+2\Sigma J(p,\alpha-p)(\overset{+}{p}\ \overset{0}{\alpha-p}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{0}{\gamma};\\
&+\{2J(\alpha+\beta,\beta)\langle\overset{0}{\beta}\ \overset{0}{-\beta}\rangle_C+J(\alpha,\alpha+\beta)\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{-}{-\alpha}\rangle\}(\overset{+}{\alpha+\beta}\ \overset{0}{\gamma};\\
&+\{J(-\alpha-\beta,\alpha+\beta+\gamma)[\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{-}{-\alpha-\beta}\rangle_C+\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{-}{-\alpha}\rangle]+J(-\alpha-\gamma,\alpha+\gamma+\beta)[\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{0}{\beta}\ \overset{-}{-\alpha-\gamma}\rangle_C+\langle\overset{+}{\alpha}\ \overset{-}{-\alpha}\rangle]\\
&+2J(\alpha+\beta+\gamma,\beta+\gamma)\langle\overset{0}{\beta}\ \overset{0}{\gamma}\ \overset{0}{-\beta-\gamma}\rangle_C\}(\overset{+}{\alpha+\beta+\gamma};
\end{aligned}$$

$$+\{2J(\alpha+\gamma,\gamma)<{}^{0\ 0}_{\gamma\,-\gamma}>_c + J(\alpha,\alpha+\gamma)<{}^{+\ -}_{\alpha\,-\alpha}>_c\}({}^{+}_{\alpha+\gamma}\,{}^{0}_{\beta}\ ;\ \ 。$$

これは一見Table II の式を再現していないように見える。しかし角型括弧内を交換関係を使つてまとめると一致する。最後の項はTable II にも実際は存在するが、元のグリーン関数にもどる項をひろうという条件から捨てられている。実はこの項を捨てたことがMatsubara[1] が示したような収束してガウス型となる連分数解を高温の極限で与えなくしている。詳細は § 5 で吟味する。

以上の考察からTomita 型の cumulant グリーン関数を使う処法は、母関数法の立場から裏づけられたと思う。即ち実際にグリーン関数の方程式を作る時は高次のグリーン関数にあらゆる可能な decoupling をほどこせばよい。

3) グリーン関数の階層を切断するということはその次数の方程式を作る時に (20) において δA_c を含まぬ項を $\mathscr{H}^c$ から除くことになる。又極低温側で C−S−W−A[6] のように $d/dt\cdot\overset{\circ}{S}=0$ がよい近似の場合には $\mathscr{H}^c$ の中で η のかかつた項がすべて省略出来、式が簡単化される。

4) Callen 型[7] の decoupling に対応する処法は任意温度のは容易でないが $\overset{\circ}{S}=S-\overset{-}{S}\overset{+}{S}$ が使える領域では以上の Formalism を多少変更して

$$G[\xi\,\eta\,\rho]=\Sigma\frac{1}{\ell!(m-1)!}\{\xi\,\eta\,\rho\}[\overset{-}{p_1}\cdots p_\ell\,|\overset{+}{q_1}\cdots\overset{+}{q}_{m-1}\,;\overset{+}{q_m}]_{\ell m}$$

$$A[\xi\,\eta]=\Sigma\frac{1}{\ell!m!}\{\xi\,\eta\}A_{\ell m}+1$$

$$=\exp\{\Sigma\frac{1}{\ell!m!}\{\xi\,\eta\}a_{\ell m}\}=\exp\{A_c\}$$

$$A_{\ell m}=<\overset{-}{p_1}\cdots\overset{-}{p_\ell}\,\overset{+}{q_1}\cdots\overset{+}{q_m}>$$

$$a_{\ell m}=<\overset{-}{p_1}\cdots\overset{-}{p_\ell}\,\overset{+}{q_1}\cdots\overset{+}{q_m}>_c$$

$$\mathscr{H}=\omega-\Sigma\{\omega_0+2J(p,0)NS\}(\xi_p\frac{\delta}{\delta\xi_p}-\eta_p\frac{\delta}{\delta\eta_p})$$

$$+2\sum_{\substack{p+q=\ell\\ r+s=q}}J(p,q)(\xi_\ell\frac{\delta}{\delta\xi_p}\frac{\delta}{\delta\xi_s}\frac{\delta}{\delta\eta_r}-\eta_\ell\frac{\delta}{\delta\eta_p}\frac{\delta}{\delta\xi_s}\frac{\delta}{\delta\eta_r})$$

とすればよい。Cumulant 型への変換は同じである。このFormalism ではハミルトニアンは著るしく簡単化されるがそのシワ寄せが非斉次項に来て非常に複雑になる。交換相互作用以外の項を取り入れることは容易である。注意すべきことはオペレーターの対称化が一般の相互作用の場合には必要となることである。

§5　ガウス型吸収線の場合

i) 多少非現実的なモデルではあるが、次のようなハミルトニアンで支配されるスピン系を考える。

$$H = -\omega_0 \Sigma \overset{\circ}{S}_j - \frac{K}{2} \Sigma (\overset{\circ}{S}_j)^2 \tag{24}$$

スピンは相互に結合していないから単一スピンの横成分の運動を調べることになる。横成分の方程式は

$$\frac{d}{dt} \overset{+}{S}_g = \omega_0 \overset{+}{S}_g + K \overset{+}{S}_g \overset{\circ}{S}_g + K \overset{\circ}{S}_g \tag{25}$$

(以下スピンの座標は常に同じだからはぶくことにする)

グリーン関数

$$G_m = \theta(t-t_0) < [\overset{+}{S} \overbrace{\overset{\circ}{S} \cdots \overset{\circ}{S}}^{m}, \overset{-}{S}] > \tag{26}$$

の母関数を

$$G[\xi \eta \rho] = \sum_m \xi \eta^m \rho G_m \tag{27}$$

非斉次項はとりあえず$I[\xi \eta \rho]$とあらわしておくと$G[\xi \eta \rho]$の従う方程式は

$$\mathscr{H}[\xi \eta] G[\xi \eta \rho] = I[\xi \eta \rho] \tag{28}$$

となる。ここでハミルトニアン$\mathscr{H}$は (25)より

$$\mathscr{H}[\xi \eta] = \omega - \omega_0 - K\frac{\delta}{\delta \eta} - K\xi \frac{\delta}{\delta \eta} \tag{29}$$

と求まる。$G_{m=0}$ が求めるべきグリーン関数である。

ii) 充分高温では $<\overset{\circ}{S}>(\sim\omega_0/kT)$ を小さい量として省略出来る。二体のスピン相関関数は

$$<\overset{\circ}{S}\,\overset{\circ}{S}>\simeq\frac{1}{2}<\overset{+}{S}\,\overset{-}{S}>\simeq\frac{1}{3}S(S+1)=r \tag{30}$$

となる。

この近似の範囲では $\mathscr{H}$ の中の最後の項 $K\xi\cdot\delta/\delta\eta$ は無視できる。

$\mathscr{H}$ の下で生ずるスピン相関関数 $<\overset{\circ}{S}{}^m>$ は m＝odd ですべてきえ、m＝even しか残らない。従つて相関関数 $A[\eta]$ は次のように簡約化できる。

$$A[\eta]=1+\sum_m\frac{1}{m!}\eta^m<S^m>=\exp\{\sum\frac{1}{m!}\eta^m<\overset{\circ}{S}{}^m>_c$$
$$\simeq\exp\frac{1}{2!}\eta^2<\overset{\circ}{S}{}^2>_c=e^{\alpha} \tag{31}$$

非斉次項の一般項を書くことは止め高温近似の範囲内で求めると単に

$$I[\xi\eta\rho]=\xi\rho\,2i<\overset{\circ}{S}>\equiv\mathscr{I} \tag{32}$$

となつてしまう。以上の近似を (28)に代入する。

更に前例にならいCumulant 型グリーン関数

$$e^{\alpha}\mathscr{G}(\xi\eta\rho)=G[\xi\eta\rho] \tag{33}$$

$$\mathscr{G}(\xi\eta\rho)=\sum\frac{1}{m!}\xi\eta^m\rho\mathscr{G}_m \tag{33'}$$

を導入すると $\mathscr{G}$ の従う方程式は

$$\mathscr{H}^c=e^{-\alpha}\mathscr{H}e^{\alpha} \tag{34}$$

を用いて

$$\mathscr{H}^c\mathscr{G}=\mathscr{I} \tag{35}$$

或は具体的に書き下すと

$$\left(\omega-\omega_0-K\frac{\delta}{\delta\eta}-K\gamma\eta\right)\mathcal{G}(\eta)=\mathcal{I} \tag{35)'$$

$\omega-\omega_0=x$　$\eta=K\lambda$　$\sigma^2=K^2\gamma$ と変数変換すると

$$\left(x-\frac{\delta}{\delta\lambda}-\sigma^2\lambda\right)\mathcal{G}(\lambda)=\mathcal{I} \tag{35)''$$

これは正しくMatsubara[1)]の(26)に一致するので$\mathcal{G}(\lambda)$の解は容意に書けて

$$G_0=\mathcal{G}(0)=\cfrac{\mathcal{I}}{x-\cfrac{\sigma^2}{x-\cfrac{2\sigma^2}{x-\cfrac{3\sigma^2}{x-\ddots}}}} \tag{36}$$

$$=i\mathcal{I}\int_0^\infty \exp\left\{-\frac{\sigma^2}{2}t^2+ixt\right\}dt \tag{37}$$

となる。即ちG_0の実数部分（$G_0(x)$の定義に虚数iを加えていないので逆になる）は半値巾が$\sqrt{\sigma^2}$のガウス分布関数である。

§ 6 Discussion II and Summary

同じ問題をTomita の処法で、上と同じ近似で解いてみると全く同じ連分数解が得られる。ただし何処かでグリーン関数の階層を切断せねばならないことはいうまでもない。しかし解の型が無限項まで同じ型になるであろうと予想される。

所でTomita の処法で既にえられている解のTable II に直接高温近似を持ちこむと

$$G = \cfrac{\mathscr{I}}{x - \cfrac{\sigma^2}{x - \cfrac{\sigma^2}{x - \cfrac{\sigma^2}{x}}}}$$

$$\text{-----}$$
$$\text{-----}$$

となつてGauss型を与えない。その理由はこうである。グリーン関数の方程式を順次構成しCumulant 型にdecouple してゆく

$$\left(\begin{matrix} + & ; & - \\ k & & -k \end{matrix}\right) \longrightarrow \left(\begin{matrix} + & 0 & ; & - \\ q & k-q & & -k \end{matrix}\right) \longrightarrow \left(\begin{matrix} + & 0 & 0 & ; & - \\ q' & q-q' & k-q & & -k \end{matrix}\right)$$

の系列を考えるとDiscussion I で書き下した式を想起してもらえば、高温近似の範囲内で必要な項は

$$(\omega-\omega_0)\left(\begin{matrix} + & 0 & 0 \\ q' & q-q' & k-q \end{matrix}\right) = I + r\,(J(q',q-q')+K)\left(\begin{matrix} + & 0 & ; & - \\ q & k-q & & -k \end{matrix}\right)$$
$$+ r\,(J(q',k-q)+K)\left(\begin{matrix} + & 0 & ; & - \\ k-q+q' & q-q' & & -k \end{matrix}\right) +$$
$$\text{(higher order)}$$

となる。相互作用係数が常数でない場合には右辺第三項は上記の系列の何処にも属さないからという理由で捨てられたが、常数係数の場合にはグリーン関数の足がうまく動かせてまとめられることがわかる。この場合に限りTable II は正確ではなくなる。

前半では母関数法によりDecoupling の体系的な処法を提察し、Tomita の処法の裏づけを得た。後半においては吸収線がガウス型になる一例を取りあげたにすぎない。相互作用が二種以上共存している場合、或は単一でも双極子相互作用のような場合には必ずしもガウス極限を持つてはいない[4]。どういう場合にガウス型に近づくかの一般論は残された問題である。又階層の或段階で閉

じさせる近似がどういう性質のものかも将来に残される。

終りに熱心に御討論下さいました松原先生，田中基之先生をはじめ研究室の方々に感謝の意を表します。

文　　献

1) T. Matsubara : Prog. Theor. Phys. 32 ('64) .50
2) See, for example ; V.L. Bonch-Bruevich and S.V. Tyablikov, The Green Function Method in Statistical Mechanics (North-Holland)
3) K. Tomita and M. Tanaka ; Prog Theor. Phys. 29 ('63) ,528
M. Tanaka and K. Tomita ; ibid 29 ('63) ,651
K. Tomita et al ; ibid 29 ('63) ,817
4) See, for example ; A. Abragam 著(富田，田中訳)，核の磁性（吉岡書店）第Ⅳ章
5) R. Kubo ; J. Phys. Soc, Japon 17 ('62) ,1100
6) A.M. Clogston, H. Suhl, L.R. Walker and P.W. Anderson ; J. Phys. Chem. Solids 1 ('56) ,129
7) H.B. Callen ; Phys. Rev. 130 ('63) ,890